Title	自己無撞着摂動理論とその低温極限(V. 理論,価数揺動状態の総合的研究,科研費研究会報告)
Author(s)	倉本, 義夫
Citation	物性研究 (1984), 42(6): 45-48
Issue Date	1984-09-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/91427
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

自己無撞着摂動理論とその低温極限

東北大・工　倉本義夫

§1. 序論

価数揺動現象を示す稀土類化合物は，局在する性格の強い4f電子とバンド的な伝導電子との相互作用により種々の興味ある物性を示す。この理解のためには，高温域では孤立4f殻から出発する摂動論が自然であることは論をまたない。その摂動論を自己無撞着に遂行することにより，4f電子が遍歴的になる低温域に迄適用可能領域が広がる可能性がある。このような可能性を追求するにあたり，フェルミ，ボース両統計に従わない状態（4f殻状態）に対して使い易い摂動論を開発することが前提となる。著者はGoldstone型の摂動展開を用いることにより，通常の温度グリーン関数法と類似した理論形式を発展させてきた[1]。この自己無撞着摂動理論では，物理量の解析性，総和則，保存則等がすべて満たされており，動力学と熱力学を統一的に論ずることができる。

本稿では，まず自己無撞着摂動理論が絶対零度の極限でBrillouin-Wigner (B-W)型の摂動論を包含していることを示す。後者は，基底状態のエネルギーと波動関数を求めるのに便利である[3,4]が，我々の理論には更に励起状態のスペクトルも議論できる利点がある。次に有限温度で自己無撞着摂動理論をCe系に適用して得られた結果の一部を報告する。この結果は金研の小島英嗣，立木昌両氏との共同研究の産物であり，より詳細な報告は原論文[2]になされている。

§2. Resolventの導入

価数揺動系或いは近藤系のモデルとして，金属固体中に一つの稀土類不純物がある系を考える。伝導電子系のハミルトニアンを$\mathcal{H}_c$，4f電子系のそれを$\mathcal{H}_f$と書き，$\mathcal{H}_0=\mathcal{H}_c+\mathcal{H}_f$を無摂動ハミルトニアンとみなす。伝導電子と4f電子は混成により相互作用すると考えて，そのハミルトニアン$\mathcal{H}_1$を摂動とする。全系の大分配関数Zは全ハミルトニアン$\mathcal{H}=\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1$に対する統計和であるが，伝導電子部分$Z_c=\mathrm{Tr}_c\exp(-\beta\mathcal{H}_c)$を因子化して$Z=Z_cZ_f$と書く。$Z_f$は$\mathcal{H}_1$の効果をくりこんだ4f系の大分配関数とみなせる。$Z_f$は4f殻状態を基底とするresolvent行列$\mathbb{R}(z)$により

$$Z_f=\int_C\frac{dz}{2\pi i}\,e^{-\beta z}\,\mathrm{Tr}_f\,\mathbb{R}(z), \qquad (1)$$

と表わせる。ここで積分径路Cは実軸を反時計回りに囲む。$\mathbb{R}(z)$は自己エネルギー行列$\Sigma(z)$を用いて$\mathbb{R}(z)=[z-\mathcal{H}_f-\Sigma(z)]^{-1}$と書ける。$\mathcal{H}_1=0$の時は$\Sigma(z)=0$となり，(1)は$\mathrm{Tr}_f\exp(-\beta\mathcal{H}_f)$に帰着する。また$\mathbb{R}(z)$は実軸以外では解析的である。従って，(1)の形から$-\pi^{-1}\mathrm{Im}\,\mathbb{R}(\varepsilon+i\delta)$　(ε: real, δ: 無限小>0)がくりこまれた4f殻状態のスペクトル密度を表わしていることがわかる。統計因子$e^{-\beta z}$が示すように，くりこまれた4f殻状態はBoltzmann統計に従う。

§3. Brillouin-Wigner 型摂動論との関係

Damping theory の手法を用いると，$\Sigma(z)$ に対して形式的に厳密な表現を与えることができる[1]。絶対零度の極限では

$$\Sigma(z) = \langle g | \mathcal{H}_1 (z + E_g - \mathcal{H}_0 - Q\mathcal{H}_1)^{-1} Q\mathcal{H}_1 | g \rangle, \tag{2}$$

が得られる。ここで $|g\rangle$, E_g は各々 $\mathcal{H}_c$ の基底状態ベクトル，エネルギーを表わし，$Q = 1 - |g\rangle\langle g|$ である。(2)の分母を $Q\mathcal{H}_1$ で展開した形は既存の B-W 摂動論[5]の有効相互作用に該当する。$\mathcal{H}$ の基底状態エネルギーを $\tilde{E}_g$ とすると，$z = \tilde{E}_g - E_g = \Delta E$ を代入した $\mathcal{H}_f + \Sigma(\Delta E)$ が 4f 殻状態をモデル空間[5]に選んだ場合の B-W 理論の有効ハミルトニアンである。4f 殻状態の一つを $|\gamma\rangle$ とすると，ΔE を決める方程式は

$$[\mathcal{H}_f + \Sigma(\Delta E)]\,|\gamma\rangle = \Delta E\,|\gamma\rangle, \tag{3}$$

となる。(3) と $R(z)$ の定義を見比べると，我々の $R(z)$ は $z \to \Delta E$ で発散することがわかる。ここで ΔE はすべての $|\gamma\rangle$ に共通である。これは系が $z = \Delta E$ の上に連続スペクトルを持つこと，及び $\mathcal{H}$ の波動関数は $\mathcal{H}_1$ の効果によりすべての $|\gamma\rangle$ を含んでいることから帰結される。即ち，系の基底状態エネルギーは singlet 状態と multiplet 状態で全く同一になる。この結論は厳密なものであり，s-d モデルにおける近藤の注意[6]と整合する。

上記より，$R(z)$ は $T=0$ においては $z < \Delta E$ の実軸で解析的になることがわかる。有限温度では cut は実軸全体に及ぶ。

§4. NCA (non-crossing approximation)

今迄の議論は近似を含んでいないが，実際に $\Sigma(z)$ を決めるには何らかの近似が必要である。動的応答を自己矛盾なく記述する最も単純な近似は，伝導電子線の交叉しない Goldstone 図形をすべて集めたものであり，NCA と呼ばれる[1]。この近似では連立積分方程式から $\Sigma(z)$ 及び $R(z)$ が求められる。絶対零度においては，NCA の与える基底状態エネルギー ΔE は §3 の議論と整合しすべての $|\gamma\rangle$ で共通になる[7]。$4f^n$ 状態の縮重度を [J]，$4f^{n-1}$ 状態のそれを [j] とすると，ΔE 近傍の z において resolvent は

$$R_J(z) \sim (\Delta E - z)^{-\frac{[J]}{[J]+[j]}}, \qquad R_j(z) \sim (\Delta E - z)^{-\frac{[j]}{[J]+[j]}}, \tag{4}$$

のようにふるまうことが示せる[7]。

§5. Ce 系に対する計算結果

NCA で求めた $R(z)$ から 4f 電子の状態密度 $\rho_{4f}(\varepsilon)$，及び動的帯磁率 $\chi(\omega)$ 等が計算できる。この手続きは，温度グリーン関数法とその解析接続の手法と類似している。計算の詳細は原論文[1, 2]に譲り，ここでは Ce 系に対する結果の一部のみを示す。図1は，近藤領域（4f 電子数 $n_f \sim 0.96$）における $\rho_{4f}(\varepsilon)$ である。ここでフェルミ準位より測った 4f 準位 ε_f は -1200 K とし，$n_f \to 0$ での共鳴準位巾が 190 K になるように，

§6．今後の展望

自己無撞着摂動理論は，現実的な4f殻の構造を入れられる点，及び全温度領域で動力学と熱力学を統一的に議論できる点で価数揺動系の実用的な理論と言える。このことは，本稿で紹介した結果及び，[1, 2] で与えた広範な諸結果で裏づけられている。しかし，NCAでは交叉したグラフがとり入れられていないので，4f準位の縮重度が小さい場合には物理量によっては誤差が無視できなくなる。交叉したグラフをとり入れた自己無撞着理論の定式化は容易であるが，$\Sigma(z)$ に対する積分方程式が著るしく複雑になる。

高密度近藤系及び価数揺動系の顕著な特徴として，異なる稀土類イオン間の干渉効果が小さい点を挙げられる。NCAではこの効果ははじめから無視されているが，干渉効果が実際に小さくなることを理論的に示すことは大いに興味がある。この場合，巨視的な数の稀土類イオンを扱うために，大分配関数の摂動展開は不適当であり，cumulant 展開等の手法で熱力学ポテンシャルの展開を行なう必要がある。NCA程度のレベルで高濃度近藤系を扱うことは近い将来に解決可能な課題である，と考えられる。

参考文献

[1] Y. Kuramoto : J. Magn. and Magn. Mater. 31-34, 463 (1983);
Z. Phys. B 53, 37 (1983);
Proc. CAP/NATO Advanced Study Institute "Moment Formation in Solids" (to be published).

[2] H. Kojima, Y. Kuramoto, M. Tachiki : submitted to Z. Phys. B ('83).

[3] K. Yosida, A. Yoshimori : "Magnetism V" (Academic '73) p.253.

[4] S. Inagaki : Prog. Theor. Phys. 62, 1441 ('79).

[5] I. Lindgren, J. Morrison : "Atomic Many-Body Theory" (Springer '82).

[6] J. Kondo : Phys. Rev. 154, 644 ('67).

[7] Y. Kuramoto, H. Kojima : to be published.

[8] N. Takigawa et al. : J. Magn. and Magn. Mater. 31-34, 391 ('83).

[9] Murani, A.P. : Phys. Rev. B28, 2308 ('83).